

540,003

(12) DEMANDE INTERNATIONALE PUBLIÉE EN VERTU DU TRAITÉ DE COOPÉRATION
EN MATIÈRE DE BREVETS (PCT)(19) Organisation Mondiale de la Propriété
Intellectuelle
Bureau international(43) Date de la publication internationale
22 juillet 2004 (22.07.2004)

PCT

(10) Numéro de publication internationale
WO 2004/061432 A2(51) Classification internationale des brevets⁷ :

G01N 21/21

(72) Inventeur; et

(75) Inventeur/Déposant (pour US seulement) : HAZART,
Jérôme [FR/FR]; 10, Place Saint-Eynard, F-38000 Greno-
ble (FR).

(21) Numéro de la demande internationale :

PCT/FR2003/050211

(74) Mandataire : POULIN, Gérard; c/o Brevatome, 3 rue du
Docteur Lancereaux, F-75008 Paris (FR).

(22) Date de dépôt international :

24 décembre 2003 (24.12.2003)

(81) État désigné (national) : US.

(25) Langue de dépôt :

français

(84) États désignés (régional) : brevet européen (AT, BE, BG,
CH, CY, CZ, DE, DK, EE, ES, FI, FR, GB, GR, HU, IE,
IT, LU, MC, NL, PT, RO, SE, SI, SK, TR).

(26) Langue de publication :

français

(30) Données relatives à la priorité :

02/16847 30 décembre 2002 (30.12.2002) FR
03/50635 2 octobre 2003 (02.10.2003) FR

Publiée :

— sans rapport de recherche internationale, sera republiée
dès réception de ce rapport(71) Déposant (pour tous les États désignés sauf US) : COM-
MISSARIAT A L'ENERGIE ATOMIQUE [FR/FR];
31-33 rue de la Fédération, F-75752 Paris 15ème (FR).En ce qui concerne les codes à deux lettres et autres abrégia-
tions, se référer aux "Notes explicatives relatives aux codes et
abréviations" figurant au début de chaque numéro ordinaire de
la Gazette du PCT.(54) Title: METHOD FOR THE OPTICAL CHARACTERIZATION OF MATERIALS WITHOUT USING A PHYSICAL
MODEL

(54) Titre : PROCEDE DE CARCTERISATRION OPTIQUE DE MATERIAUX SANS UTILISATION DE MODELE PHYSIQUE

(57) Abstract: A method for the characterization of materials without using a physical model. In order to characterize a layer of material in a space A of values assumed by a function $\alpha(\lambda)$ (λ : wavelength), (1) by reflectometry and/or ellipsometry on A, a measured spectrum Ψ is obtained, (2) m values $\alpha_1 \dots \alpha_m$ of α in A ($m \geq 1$) are chosen, with $B = \{ \alpha \text{ such as } \min(\alpha_i) \leq \alpha \leq \max(\alpha_i) \}$ for $m > 1$, and $B = A$ si $m = 1$, (3) m complex index values n_{+jk} to m α_i are chosen, (4) if $m \neq 1$ the index $n(A)$ on B is calculated by interpolation, on the basis of $(\alpha_i, n_i = n(\alpha_i))$, $1 \leq i \leq m$, and if $m = 1$, $n(\alpha) = n_1(\alpha_1)$ on B, (5) M parameters $M = 2m + 1$ are chosen, in addition to an error function E_r and by minimization of E_r to M parameters, (a) with the aid of the law of interpolation of (α_i, n_i) on B, $n(\alpha)$, $\alpha \in B$, (b) is deduced with the aid of $n(\alpha)$ and the thickness e of the layer, a theoretical spectrum $\Psi(n(\alpha))$ is calculated, (c) Ψ and Ψ are compared with the aid of E_r and, if $E_r(\Psi, \Psi)$ is or minimal, it is possible to move on to $\langle u \rangle e \langle u \rangle$, if not (d) M parameters are varied in order to tend towards the minimum of $E_r(\Psi, \Psi)$ and it is possible to move on to (a), (e) if $E_r(\Psi, \Psi) < \langle u \rangle e \langle u \rangle$, the index is equal to the latter thus obtained, if not m is increased and it is possible to move onto (2).

(57) Abrégé : Procédé de caractérisation optique de matériaux sans utilisation de modèle physique. Pour caractériser une couche d'un matériau dans un intervalle A de valeurs prises par une fonction $\alpha(\lambda)$ (λ : longueur d'onde), (1) par réflectométrie et/ou ellipsométrie sur A on obtient un spectre mesuré Ψ , (2) on choisit m valeurs $\alpha_1 \dots \alpha_m$ de α dans A ($m \geq 1$), avec $B = \{ \alpha \text{ tels que } \min(\alpha_i) \leq \alpha \leq \max(\alpha_i) \}$ pour $m > 1$, et $B = A$ si $m = 1$, (3) on choisit m valeurs d'indice complexe n_{+jk} aux m α_i , (4) si $m \neq 1$ on calcule par interpolation l'indice $n(\alpha)$ sur B, à partir des $(\alpha_i, n_i = n(\alpha_i))$, $1 \leq i \leq m$, et si $m = 1$, $n(\alpha) = n_1(\alpha_1)$ sur B, (5) on choisit M paramètres, $M \leq 2m + 1$, et une fonction d'erreur E_r et par une minimisation de E_r à M paramètres, (a) à l'aide de la loi d'interpolation des (α_i, n_i) sur B, on déduit $n(\alpha)$, $\alpha \in B$, (b) à l'aide de $n(\alpha)$ et de l'épaisseur e de la couche, on calcule un spectre théorique $\Psi(n(\alpha), e)$, (c) on compare Ψ et Ψ à l'aide de E_r et, si $E_r(\Psi, \Psi)$ est ou minimal, on passe à (e), sinon (d) on fait varier les M paramètres pour tendre vers le minimum de $E_r(\Psi, \Psi)$ et on va à (a), (e) si $E_r(\Psi, \Psi) < \langle u \rangle e \langle u \rangle$, l'indice est pris égal à celui obtenu en dernier, sinon on augmente m et on va à (2).

WO 2004/061432 A2

PROCEDE DE CARACTERISATION OPTIQUE DE MATERIAUX SANS
UTILISATION DE MODELE PHYSIQUE

5

DESCRIPTION

DOMAINE TECHNIQUE

La présente invention concerne un procédé de caractérisation optique de matériaux.

Ce procédé permet de caractériser des
10 couches minces ou épaisses de ces matériaux, qui sont formées sur des substrats. Les grandeurs physiques, que ce procédé permet de déterminer, sont:

- l'épaisseur d'une couche d'un matériau,
- l'indice de réfraction de ce matériau, et
- 15 - le coefficient d'absorption de ce matériau.

La caractérisation optique des matériaux est utile pour l'analyse chimique de ces matériaux (notamment étude des bandes d'absorption, des
20 propriétés de densification et des propriétés d'oxydation), dans les domaines de la micro-électronique, des capteurs, de la biologie, de la médecine), ou bien pour l'analyse des épaisseurs de dépôts de ces matériaux.

25 Pour des exemples d'application, on se reportera au document [1] qui, comme les autres documents cités par la suite, est mentionné à la fin de la présente description.

La caractérisation des propriétés optiques
30 d'un matériau est également utile lorsque le matériau est par la suite structuré (pour y former par exemple

des gravures ou des rugosités) et que les propriétés de diffraction optique de la structure obtenue doivent être calculées (voir le document [2]).

Indiquons dès à présent que l'invention est
5 particulièrement utile lorsque la loi physique suivie par l'indice de réfraction complexe du matériau que l'on veut caractériser n'est, a priori, pas connue.

ETAT DE LA TECHNIQUE ANTERIEURE

10 On rappelle que les mesures optiques peuvent être de diverses natures :

Il peut s'agir de mesures réflectométriques. Dans ce cas, le coefficient de réflexion en intensité d'une structure est mesuré sur
15 un spectre (c'est-à-dire un intervalle) de longueurs d'ondes $[\lambda_m, \lambda_M]$.

L'angle d'incidence de la lumière d'éclairement peut être non nul. Le coefficient de réflexion peut être mesuré pour plusieurs angles
20 d'incidence θ . Nous noterons $R(\theta, \lambda, p)$ le spectre réflectométrique, où p est la polarisation du faisceau incident et λ la longueur d'onde de ce dernier.

Généralement, l'angle θ est nul et la polarisation p indéterminée. Dans le cas où θ n'est pas
25 nul, il faut connaître cette polarisation p . En général, cette dernière est de type (S) ou (P).

Il peut s'agir aussi de mesures ellipsométriques. Les grandeurs mesurées sont alors les parties réelle et imaginaire du rapport du coefficient

de réflexion en polarisation (P) au coefficient de réflexion en polarisation (S).

On note généralement $\rho = |\rho| \exp(j\Delta)$ ce rapport complexe (avec $j^2 = -1$). Les grandeurs
5 généralement traitées sont $|\rho|$, que l'on note $\tan(\psi)$, et $\cos(\Delta)$, ou des combinaisons des deux.

Par exemple, les variables issues d'un ellipsomètre à modulation de phase sont les suivantes :

$$I_s = \sin(2\psi) \sin(\Delta) \text{ et } I_c = \cos(2\psi).$$

10 Un ellipsomètre classique fournit, quant à lui, les variables suivantes :

$$\alpha = (\tan^2\psi - 1) / (\tan^2\psi + 1) \text{ et } \beta = \cos\Delta (1 - \alpha^2)^{1/2}.$$

Par souci de généralité, nous noterons S_1 et S_2 les grandeurs traitées.

15 Les spectres $S_1, i \in [1, 2]$, sont mesurés sur une plage de longueurs d'ondes $[\lambda_m, \lambda_M]$. L'angle d'incidence peut être quelconque. Plusieurs spectres peuvent être mesurés à différents angles d'incidence afin d'obtenir un spectre plus riche. Nous noterons
20 $s(\theta, \lambda) = \{S_1(\theta, \lambda), S_2(\theta, \lambda)\}$ le spectre ellipsométrique.

De façon complémentaire, des mesures goniométriques (coefficient de réflexion en fonction de l'angle d'incidence) peuvent être ajoutées aux mesures servant à la caractérisation, afin de déterminer
25 l'épaisseur des diverses couches, pour une ou plusieurs longueurs d'ondes. Ces mesures ne sont pas suffisantes en elles-mêmes puisque l'on veut déterminer l'indice de réfraction complexe sur une gamme spectrale allant de λ_m à λ_M .

Afin de simplifier l'exposé, nous noterons Ψ un ensemble de spectres réflectométrique ou/et ellipsométrique(s) (et éventuellement goniométriques pour quelques longueurs d'ondes).

5 Sans perdre aucune généralité, nous n'exposerons, dans la présente description, le mode d'utilisation des procédés de l'art antérieur et de la présente invention que dans le cas d'une seule couche mince d'un matériau, formée sur un substrat connu.

10 L'épaisseur de cette couche est notée ε et l'indice de réfraction complexe du matériau à la longueur d'onde λ est noté $n^*(\lambda)$.

On rappelle à ce propos que la partie réelle (respectivement imaginaire) de cet indice de
15 réfraction complexe est notée $n(\lambda)$ (respectivement $k(\lambda)$) et appelée "indice de réfraction" (respectivement "coefficient d'extinction").

En outre on note $E_r(\Psi^{(1)}, \Psi^{(2)})$ une fonction d'erreur (par exemple l'écart quadratique moyen) entre
20 deux spectres $\Psi^{(1)}$ et $\Psi^{(2)}$.

Par exemple, on pourra prendre, lorsque l'on dispose de spectres ellipsométriques sur plusieurs angles θ_i , $i \in \{1..n\}$, et d'un spectre réflectométrique :

$$E_r(\Psi^{(1)}, \Psi^{(2)}) = \frac{1}{\lambda_M - \lambda_m} \int_{\lambda_m}^{\lambda_M} \left[\frac{1}{n} \sum_{i=1}^n [S_1^{(1)}(\theta_i, \lambda) - S_1^{(2)}(\theta_i, \lambda)]^2 + [S_2^{(1)}(\theta_i, \lambda) - S_2^{(2)}(\theta_i, \lambda)]^2 \right. \\ \left. + [R^{(1)}(\lambda) - R^{(2)}(\lambda)]^2 \right] d\lambda \quad (1)$$

avec $\Psi^{(1)}(\lambda) = \{S_1^{(1)}(\theta_1, \lambda), S_2^{(1)}(\theta_1, \lambda), R^{(1)}(\lambda)\}$

$\Psi^{(2)}(\lambda) = \{S_1^{(2)}(\theta_1, \lambda), S_2^{(2)}(\theta_1, \lambda), R^{(2)}(\lambda)\}$

et $i \in \{1 \dots n\}$

Des facteurs de pondération peuvent être apportés à l'intégrale de façon à ce que la fonction d'erreur puisse tenir compte de variations sur la
5 précision de mesure des spectres.

La caractérisation optique de couches de matériaux s'articule généralement autour de deux applications :

La première application est le contrôle
10 dimensionnel du dépôt de couches minces que l'on utilise en microélectronique.

Généralement on connaît bien le matériau déposé, c'est-à-dire que l'on connaît bien l'indice de réfraction complexe de ce matériau aux longueurs
15 d'ondes de la lumière utilisée pour la caractérisation.

Les lois suivies par l'indice de réfraction complexe sont soit tabulées, soit approchées par des lois physiques connues telles que, par exemple, le modèle de Cauchy, le modèle de Sellmeier (voir le
20 document [3]), les lois de Forouhi (voir le document [4]), et les lois d'oscillateurs harmoniques (voir le document [5]). Ces lois sont définies par un nombre fini de paramètres.

Par exemple, une loi de type Cauchy sans
25 absorption, à deux paramètres, est définie de la manière suivante :

$$\operatorname{Re}[n^*(\lambda)] = n(\lambda) = a_0 + \frac{a_1}{\lambda^2}$$

$$\operatorname{Im}[n^*(\lambda)] = k(\lambda) = 0$$

Lorsque l'on est sûr de la valeur des
30 coefficients $a_i (i \in \{0, 1\})$ mais que l'on ne connaît pas

l'épaisseur, un algorithme de recherche est utilisé afin de trouver l'épaisseur qui minimise l'erreur entre la mesure Ψ et la réponse théorique $\bar{\Psi}$ compte tenu de l'indice modélisé.

5 L'algorithme de recherche peut être, par exemple, la méthode du Simplex, la recherche Tabou, la méthode de Levenndt-Marquart ou la méthode du recuit simulé (voir le chapitre 10 du document [6]).

10 Lorsque l'indice de réfraction est approximatif, les coefficients a_i sont intégrés dans la procédure d'ajustement de Ψ et $\bar{\Psi}$. La recherche des coefficients a_i constitue un procédé de caractérisation de l'indice de réfraction.

15 Cependant, lorsque la loi suivie par cet indice de réfraction est inconnue (il arrive que le matériau soit inconnu ou qu'il ne soit pas bien décrit par une loi physique connue), ce procédé reste approximatif et l'épaisseur risque d'être fausse.

20 La deuxième application est la caractérisation des matériaux.

Le procédé utilisé reste le même, mis à part que le matériau n'est pas bien connu. C'est précisément la fonction d'indice de réfraction complexe la plus proche de la réalité qui est visée.

25 Le type de loi peut être choisi par analogie avec d'autres matériaux. Cependant, la loi suivie par l'indice de réfraction complexe peut être compliquée, ce qui est par exemple le cas d'une loi d'oscillateurs harmoniques :

30
$$[n(E) + jk(E)]^2 = 1 + \sum_{i=1}^n \frac{A_i}{E + E_i + j\Gamma_i} - \frac{A_i}{E - E_i + j\Gamma_i}$$

Dans l'expression ci-dessus, $j^2 = -1$ et l'indice de réfraction et le coefficient d'extinction sont exprimés non pas en fonction de λ mais de E , avec $E = 1240/\lambda$ (λ en nm).

5 Dans ce cas, les coefficients des oscillateurs sont difficiles à trouver si l'on n'a pas leur ordre de grandeur. La recherche est difficilement automatisable, les algorithmes de recherche pouvant donner des réponses erronées et le temps perdu peut
10 être considérable.

Il existe une alternative à la recherche des coefficients : la méthode point-à-point (PAP). Cette méthode PAP propose de ne pas choisir de loi physique et de rechercher l'indice de réfraction
15 complexe du matériau pour chaque longueur d'onde λ_1 , où $i \in [1 \dots n]$, avec $\lambda_1 = \lambda_m$ et $\lambda_n = \lambda_M$.

Pour chaque λ_1 , un algorithme de recherche tente de trouver l'épaisseur, l'indice $n(\lambda_1)$ et le coefficient d'extinction $k(\lambda_1)$ qui minimisent l'erreur
20 entre la mesure $\Psi(\lambda_1)$ et la réponse théorique $\bar{\Psi}(\lambda_1, n(\lambda_1), k(\lambda_1), \varepsilon)$.

Un tel procédé pose un problème parce que les divers points $(\lambda_1, \varepsilon, n(\lambda_1), k(\lambda_1))$ ne sont pas forcément physiquement compatibles entre eux : par
25 exemple, l'épaisseur trouvée peut varier en fonction de la longueur d'onde et la loi suivie par l'indice de réfraction complexe, plus simplement appelée loi d'indice, peut présenter des discontinuités.

Ce procédé est généralement valable seulement lorsque l'épaisseur est très bien connue et que les mesures sont de très bonne qualité.

5 EXPOSÉ DE L'INVENTION

La présente invention a pour but de remédier aux inconvénients précédents.

Le procédé objet de l'invention permet de caractériser un matériau sans utiliser un modèle physique, c'est-à-dire sans utiliser une loi physique
10 suivie par l'indice de réfraction complexe du matériau étudié. Il est donc tout particulièrement utile lorsqu'une telle loi n'est pas connue.

Ce procédé constitue une alternative aux
15 procédés de caractérisation connus, mentionnés plus haut. Il peut être appelé "méthode des nœuds" car il utilise des "nœuds" c'est-à-dire des points de coordonnées (λ_i, n_i^*) , où n_i^* est la valeur prise par l'indice de réfraction complexe à la longueur d'onde λ_i
20 et i prend un nombre limité de valeurs (entières).

De façon précise, la présente invention a pour objet un procédé de caractérisation optique d'au moins une couche d'un matériau dans un intervalle A de valeurs prises par une fonction α d'une longueur d'onde
25 optique λ , lorsque λ varie dans un intervalle de longueurs d'ondes, cette couche étant formée sur un substrat, ce procédé étant caractérisé en ce qu'il comprend les étapes suivantes :

1) on effectue un ensemble de mesures de
30 réflectométrie et/ou d'ellipsométrie sur l'intervalle

A, cet ensemble de mesures conduisant à un spectre mesuré, noté Ψ , et l'on choisit les méthodes de calcul associées à la nature des mesures et au type de couche à caractériser,

5 2) on choisit m valeurs initiales $\alpha_1 \dots \alpha_m$ de la fonction α , appartenant à cet intervalle A , m étant un nombre entier au moins égal à 1, et l'on définit un intervalle B comme étant l'ensemble des points α de l'intervalle allant du plus petit au plus grand des
10 nombres $\alpha_1 \dots \alpha_m$, lorsque m est supérieur à 1, et comme étant l'intervalle A lorsque m vaut 1,

3) on choisit m valeurs initiales complexes d'un indice de réfraction complexe $n^* = n + jk$ aux m points α_i , i allant de 1 à m ,

15 4) lorsque m est différent de 1, on choisit une loi d'interpolation qui permet de calculer l'indice de réfraction $n(\alpha)$ du matériau sur l'intervalle B , à partir des points (α_i, n_i) , avec $n_i = n(\alpha_i)$, i allant de 1 à m , et lorsque m vaut 1, $n(\alpha)$ est pris égal au nombre
20 $n_1(\alpha_1)$ sur tout l'intervalle B ,

5) on choisit M paramètres variables, M étant inférieur ou égal à $2m+1$,

6) on choisit une fonction d'erreur $Er(\Psi, \bar{\Psi})$ qui caractérise l'écart entre un spectre
25 mesuré Ψ et un spectre théorique $\bar{\Psi}$,

7) à l'aide d'une fonction de minimisation de $Er(\Psi, \bar{\Psi})$ à M paramètres, on effectue la série d'étapes suivante :

a) à l'aide de la loi d'interpolation des (α_1, n_1) sur l'intervalle B, on déduit $n(\alpha)$, α appartenant à B,

5 b) à l'aide de $n(\alpha)$ et de l'épaisseur ε de la couche, et de méthodes de calcul de spectres, on calcule un spectre théorique $\bar{\Psi}(n(\alpha), \varepsilon)$,

c) on compare Ψ et $\bar{\Psi}$ à l'aide de $Er(\Psi, \bar{\Psi})$ et, si $Er(\Psi, \bar{\Psi})$ est suffisamment petite, c'est-à-dire inférieure à une valeur prédéfinie \underline{e} , ou est minimale,
10 on passe à l'étape e), sinon on passe à l'étape d),

d) on fait varier les M paramètres variables de façon à tendre vers le minimum de $Er(\Psi, \bar{\Psi})$ et l'on retourne à l'étape a),

e) si $Er(\Psi, \bar{\Psi})$ est inférieure à \underline{e} , on
15 obtient donc un ensemble de M paramètres variables, pour lequel $Er(\Psi, \bar{\Psi}(n(\alpha, M), \varepsilon))$ est minimum et l'indice de réfraction est alors pris égal à celui qui a été obtenu en dernier, et si $Er(\Psi, \bar{\Psi})$ est supérieure ou égale à \underline{e} on passe à l'étape 8),

20 8) on augmente le nombre m de valeurs initiales de la fonction α et l'on retourne à l'étape 2).

Il est donc par exemple possible d'effectuer la caractérisation optique :

- 25 - sur un intervalle de longueurs d'ondes λ , en l'occurrence l'intervalle $[\lambda_{\min}, \lambda_{\max}]$,
- ou sur un intervalle de longueurs d'ondes inverses $1/\lambda$, en l'occurrence sur un intervalle

$[(1/\lambda)_{\min}, (1/\lambda)_{\max}]$, où $(1/\lambda)_{\min}$ est égal à $1/(\lambda_{\max})$ et $(1/\lambda)_{\max}$ à $1/(\lambda_{\min})$,

- ou sur un intervalle d'énergies E (avec $E = h\nu = hc/\lambda$ où h est la constante de Planck, c la
5 vitesse de la lumière dans le vide et ν la fréquence correspondant à λ), en l'occurrence sur un intervalle $[E_{\min}, E_{\max}]$, où E_{\min} est égal à $hc/(\lambda_{\max})$ et E_{\max} à $hc/(\lambda_{\min})$,

- ou, plus généralement, sur un intervalle
10 $[\alpha_{\min}, \alpha_{\max}]$ de valeurs prises par une fonction α de la variable λ .

Il convient en outre de noter que l'invention est utilisable pour caractériser un spectre ou une partie de spectre.

15 Chaque loi d'interpolation peut être choisie parmi les lois d'interpolation linéaires, les lois d'interpolation cubiques, les lois d'interpolation polynômiales et les lois d'interpolation par exemple de type fonction « spline ».

20 Selon un mode de mise en œuvre préféré du procédé objet de l'invention, le spectre est échantillonné uniformément en $\alpha(\lambda)$, c'est-à-dire que les valeurs initiales de la fonction α (voir l'étape 2) mentionnée plus haut) sont réparties de manière
25 uniforme dans l'intervalle Λ , la répartition des nœuds étant ainsi homogène.

Comme on l'a vu, $\alpha(\lambda)$ peut être choisi parmi λ , $1/\lambda$ et hc/λ ou toute autre fonction de λ , où h est la constante de Planck et c est la vitesse de la
30 lumière dans le vide.

De préférence, à l'étape 6) mentionnée plus haut, on mesure l'erreur sur un intervalle d'intérêt C qui est inclus dans l'intervalle B ou égal à cet intervalle B.

5 Les M paramètres variables peuvent être les parties réelles des indices de réfraction aux points α_i , i allant de 1 à m, ou les parties imaginaires de ces indices de réfraction, ou ces M paramètres variables peuvent être constitués par l'épaisseur du
10 matériau dont on cherche l'indice de réfraction.

La présente invention a aussi pour objet un autre procédé de caractérisation optique d'au moins une couche d'un matériau dans un intervalle de longueurs d'ondes $[\lambda_{\min}, \lambda_{\max}]$, cette couche étant formée sur
15 un substrat, cet autre procédé étant caractérisé en ce que :

- on effectue un ensemble de mesures de réflectométrie et/ou d'ellipsométrie, cet ensemble de mesures conduisant à un spectre mesuré, noté Ψ ,
- 20 - on choisit m longueurs d'ondes initiales $\lambda_1 \dots \lambda_m$ appartenant à cet intervalle, m étant un nombre entier au moins égal à 1, on associe, à chaque longueur d'onde, un indice de réfraction,
- on choisit une loi d'interpolation au moins pour
25 l'indice de réfraction du matériau, pour les longueurs d'ondes comprises entre les longueurs d'ondes initiales $\lambda_1 \dots \lambda_m$,
- on choisit M paramètres initiaux, M étant au moins égal à m, à savoir un indice de réfraction initial n_i
30 pour chaque longueur d'onde initiale λ_i , $1 \leq i \leq m$,

- les longueurs d'ondes initiales étant choisies de manière à pouvoir déterminer par interpolation au moins l'indice de réfraction pour toute longueur d'onde de l'intervalle $[\lambda_{\min}, \lambda_{\max}]$, les couples $(\lambda_i,$
5 $n_i)$ étant appelés nœuds,
- on choisit des méthodes de calcul de réflectométrie et d'ellipsométrie,
 - on choisit aussi une fonction d'erreur E_r , représentative de l'écart entre deux spectres Ψ_1 et
10 Ψ_2 , les spectres Ψ_1 et Ψ_2 étant calculés ou mesurés sur un nombre de points supérieur au nombre m de nœuds,
 - à l'aide des m longueurs d'ondes initiales, des M paramètres initiaux et de la loi d'interpolation, on
15 met en œuvre le processus d'optimisation suivant :
 - on détermine un spectre théorique, noté $\bar{\Psi}$, en fonction des méthodes de calcul choisies, et de l'indice déduit par interpolation de sa valeur en λ_i , i allant de 1 à m , sur le spectre $[\lambda_{\min}, \lambda_{\max}]$,
 - 20 - on détermine l'erreur $E_r(\Psi, \bar{\Psi})$, entre le spectre mesuré et le spectre théorique,
 - on minimise cette erreur en faisant varier la position des valeurs des indices inconnus et/ou l'épaisseur de la couche et/ou les valeurs des indices
25 de réfraction aux longueurs d'ondes initiales, et l'on obtient un spectre,
 - on ajoute des longueurs d'ondes aux longueurs d'ondes initiales $\lambda_1 \dots \lambda_m$, les longueurs d'ondes ajoutées constituant de nouveaux nœuds,

- on répète le procédé en choisissant un nombre m' de longueurs d'ondes initiales, m' étant supérieur à m , et M' paramètres initiaux, M' étant supérieur à M , jusqu'à ce que la précision sur chaque spectre ainsi
5 représenté au mieux soit égale à une précision prédéfinie.

Dans ce cas, selon un premier mode de mise en œuvre particulier, m est au moins égal à 2 ; selon un deuxième mode de mise en œuvre particulier, m est
10 égal à 1 et l'on choisit des indices de réfraction initiaux égaux.

Dans ce cas également, selon un mode de réalisation particulier, le matériau est non absorbant et le nombre M est égal à m , le coefficient
15 d'extinction du matériau étant pris égal à 0 ; selon un autre mode de réalisation particulier, M est au moins égal à 2 m , on choisit en outre une loi d'interpolation pour le coefficient d'extinction du matériau, pour chaque longueur d'onde initiale λ_i , $1 \leq i \leq m$, on
20 choisit en outre un coefficient d'extinction initial k_i , les longueurs d'ondes initiales étant en outre choisies de manière à pouvoir déterminer par interpolation le coefficient d'extinction pour toute longueur d'onde de l'intervalle $[\lambda_{\min}, \lambda_{\max}]$, et dans
25 le processus d'optimisation, on minimise l'erreur en faisant varier en outre les valeurs des coefficients d'extinction aux longueurs d'ondes initiales et les longueurs d'ondes ajoutées sont en outre placées de façon à représenter au mieux le spectre du coefficient
30 d'extinction du matériau.

Dans le cas de cet autre mode de réalisation particulier, m peut être égal à 1 et l'on peut choisir des indices de réfraction initiaux égaux et des coefficients d'extinction initiaux égaux.

5 Encore dans le cas de cet autre procédé objet de l'invention, la couche de matériau peut être mince, c'est-à-dire avoir une épaisseur inférieure à la longueur de cohérence de la lumière utilisée pour les mesures, on peut choisir un paramètre initial
10 supplémentaire, à savoir une épaisseur initiale de couche, et dans le processus d'optimisation on peut minimiser l'erreur en faisant en outre varier la valeur de l'épaisseur de couche ; dans une variante, la couche de matériau peut être épaisse, c'est-à-dire ne pas être
15 mince, et M peut être au plus égal à $2m$; dans une autre variante, l'épaisseur de la couche de matériau peut être connue avec une précision suffisante et M est au plus égal à $2m$.

20 La répartition des nœuds peut être homogène.

BRÈVE DESCRIPTION DES DESSINS

La présente invention sera mieux comprise à la lecture de la description d'exemples de réalisation
25 donnés ci-après, à titre purement indicatif et nullement limitatif, en faisant référence aux dessins annexés, sur lesquels :

- la figure 1 est une vue schématique de dispositifs permettant de caractériser une couche
30 conformément à l'invention,

- la figure 2 montre les variations de l'indice de réfraction en fonction de la longueur d'onde, pour un matériau suivant une loi de Cauchy (courbe I) et pour un matériau caractérisé conformément à l'invention (courbe II),

- la figure 3A (respectivement 3B) montre les variations de l'indice de réfraction (respectivement du coefficient d'extinction) en fonction de la longueur d'onde, pour un matériau suivant une loi à deux oscillateurs harmoniques (courbe I) et pour un matériau caractérisé conformément à l'invention, et

- la figure 4 illustre schématiquement les paramètres utilisés dans une généralisation d'exemples de l'invention.

EXPOSÉ DÉTAILLÉ DE MODES DE RÉALISATION PARTICULIERS

L'invention propose une alternative aux procédés classiques, mentionnés plus haut. Elle permet d'allier la cohérence d'un modèle de couche (correspondant à une loi d'indice continue et à des épaisseurs physiques constantes), à la généralité concernant la loi d'indice à trouver (comme dans la méthode PAP). En outre, la résolution n'est limitée que par la résolution du spectre mesuré.

Dans le procédé objet de l'invention, le spectre d'indice $n^*(\lambda)$ est caractérisé par :

- un nombre réduit de "nœuds", qui sont des points de coordonnées (λ_1, n_1, k_1) ou (λ_1, n_1^*) , avec $n_1 = n(\lambda_1)$, $k_1 = k(\lambda_1)$ et $n_1^* = n_1 + jk_1$, où $j^2 = -1$, et

- une loi d'interpolation entre les nœuds, qui peut être, par exemple, linéaire, cubique, de type « spline » ou polynômiale (de degré quelconque).

Cette loi d'interpolation permet de
5 calculer, à partir des nœuds, les indices de réfraction et les coefficients d'extinction pour les longueurs d'ondes situées entre les nœuds.

Par exemple, lorsque l'indice de réfraction est caractérisé par un ensemble de valeurs pour des
10 longueurs d'ondes $\lambda_1 \dots \lambda_m$, on peut utiliser une interpolation linéaire entre deux longueurs d'ondes λ_i et λ_{i+1} pour calculer l'indice n à la longueur d'onde λ (voir le document [6] chapitre 3) :

$$n(\lambda) = \frac{(\lambda_{i+1} - \lambda)n(\lambda_i) + (\lambda - \lambda_i)n(\lambda_{i+1})}{\lambda_{i+1} - \lambda_i}$$

15 avec $\lambda_i < \lambda < \lambda_{i+1}$

On peut faire de même pour le coefficient d'extinction.

Lorsque le nombre de nœuds le permet, des formules d'interpolation plus complexes, faisant
20 intervenir les nœuds voisins, peuvent être utilisées (voir le document [6] chapitre 3).

Un modèle de couche est donc caractérisé par une épaisseur ε et une famille de nœuds.

On donne ci-après un exemple du procédé
25 objet de l'invention. Dans cet exemple, les mesures Ψ sont constituées d'une mesure réflectométrique $R(\lambda)$ et d'une mesure ellipsométrique $S_{1,2}(\theta, \lambda)$ où θ est l'angle d'incidence du faisceau lumineux que l'on envoie sur la couche à étudier lors de la mesure d'ellipsométrie.

Cette couche est une couche mince de sorte que l'épaisseur de cette couche est aussi une variable du problème. En outre, on suppose qu'une seule couche est inconnue, cette couche étant formée sur un substrat
5 connu.

Expliquons d'abord brièvement cet exemple, qui utilise un algorithme (algorithme de la « méthode des nœuds » conformément à l'invention).

A partir d'informations supposées sur
10 l'épaisseur ε de la couche étudiée et sur l'indice de réfraction $n(\lambda)$ et le coefficient d'extinction $k(\lambda)$ du matériau de cette couche, on construit des nœuds de départ (en faible nombre) et une épaisseur de départ ε .

On dispose ainsi de m nœuds et, par
15 interpolation, on peut connaître $n(\lambda)$ et $k(\lambda)$ en dehors des valeurs des longueurs d'ondes associées aux nœuds.

A partir de l'épaisseur de départ ε et de ces valeurs de départ $n(\lambda)$ et $k(\lambda)$, on détermine le spectre théorique $\bar{\Psi}$ en utilisant des calculs
20 ellipsométriques et réflectométriques.

Par ailleurs, au moyen de dispositifs d'ellipsométrie et de réflectométrie et d'un spectromètre, on obtient $S_{1,2}(\theta, \lambda)$ et $R(\lambda)$ et l'on en déduit les mesures notées Ψ (pour des conditions de
25 mesure θ et λ).

On compare ensuite Ψ et $\bar{\Psi}$ en utilisant une fonction d'erreur E_r et l'on optimise la valeur de l'indice de réfraction et la valeur du coefficient d'extinction aux différents nœuds, ainsi que la valeur
30 de l'épaisseur, en cherchant à minimiser $E_r(\Psi, \bar{\Psi})$.

Lorsque ces valeurs sont optimisées et si la précision sur le spectre $n(\lambda)$, le spectre $k(\lambda)$ et l'épaisseur ε n'est pas suffisante, on ajoute de nouveaux nœuds, on fait varier l'épaisseur ε , et l'on recommence la détermination de $\bar{\Psi}$, la comparaison de Ψ et $\bar{\Psi}$ et l'optimisation que l'on a mentionnées plus haut, etc.

On arrête la boucle ainsi définie lorsque la précision sur chacun des spectres $n(\lambda)$ et $k(\lambda)$ et sur l'épaisseur ε est jugée suffisante (ajustement satisfaisant de Ψ et $\bar{\Psi}$).

Les spectres $n(\lambda)$, $k(\lambda)$ et l'épaisseur ε sont ainsi caractérisés.

Dans un exemple donné à titre purement indicatif et nullement limitatif, on trouve une épaisseur ε égale à 212,3nm pour la couche.

La figure 1 montre de façon schématique la couche étudiée 2, formée sur un substrat 4. On voit le dispositif d'ellipsométrie 5,6, le dispositif de réflectrométrie 8 et le spectromètre 10. On voit en outre des moyens électroniques de traitement 12, comprenant un ordinateur et permettant de caractériser $n(\lambda)$, $k(\lambda)$ et ε en fonction des informations fournies par le spectromètre 10 et conformément au procédé de l'invention.

Ces moyens 12 sont munis de moyens d'affichage 14 qui permettent, en particulier, d'afficher la courbe des variations de n en fonction de λ et la courbe des variations de k en fonction de λ .

Revenons de façon plus détaillée sur l'exemple donné.

Phase 1

Le procédé de cet exemple comporte d'abord
5 une étape d'initialisation.

L'algorithme débute avec un nombre réduit de nœuds, plus précisément au moins un nœud. On peut donc débiter par un seul nœud, en imposant un indice de réfraction et un coefficient d'extinction qui restent
10 constants lorsque la longueur d'onde varie.

On choisit des positions de nœuds de façon à pouvoir, à partir de cette famille de nœuds, déduire tout le spectre par interpolation. Le modèle de couche est donc à 3 paramètres ou plus, puisque l'épaisseur
15 est aussi une variable à déterminer. La table d'indice sur tout le spectre est donc déduite des nœuds par interpolation.

C'est le cas lorsque l'épaisseur des couches est de l'ordre de grandeur de la longueur
20 d'onde (couches minces). Mais lorsque l'épaisseur de la couche est supérieure à la longueur de cohérence de la source de lumière, l'épaisseur n'intervient quasiment plus dans le calcul de la réponse de la couche, et n'est donc plus une variable du problème.

Par exemple, dans le cas de disques
25 optiques (CDROM), sur lesquels une couche très importante est déposée (son épaisseur est de l'ordre de 1 millimètre), le coefficient de réflexion d'une telle couche n'est plus fonction de l'épaisseur de la couche
30 mais seulement de l'indice de réfraction de celle-ci, la longueur de cohérence du faisceau lumineux incident

étant inférieure à l'épaisseur de la couche. Dans ce cas précis, la longueur de cohérence du faisceau incident est déterminée par la rugosité des couches.

On choisit, par exemple, de placer les deux
5 premiers nœuds aux extrémités λ_{\min} et λ_{\max} du spectre. Les valeurs de l'indice complexe en ces extrémités sont choisies en fonction du type du matériau étudié. Par exemple, sur un spectre ellipsométrique entre 300nm et 800nm d'une couche mince
10 de résine photosensible, on prend $n(300\text{nm})=n(800\text{nm})=1,5$ et $k(300\text{nm})=k(800\text{nm})=0$.

Lorsque le spectre n'est caractérisé que par deux nœuds, l'indice entre les extrêmes est déterminé par interpolation linéaire. Dans le cas
15 considéré, on a donc $n(\lambda)=1,5$ et $k(\lambda)=0$ pour λ appartenant à $[300\text{nm}, 800\text{nm}]$.

A partir de trois nœuds, on choisit plutôt une interpolation cubique afin d'obtenir des formes de loi d'indice plus douces que celles obtenues par
20 interpolation linéaire.

L'épaisseur de départ est, quant à elle, choisie aussi proche que possible de l'épaisseur réelle.

Phase 2

25 On procède ensuite à une détermination optimale des valeurs de l'indice de réfraction et du coefficient d'extinction sur les nœuds et de la valeur de l'épaisseur.

Pour ce faire, les spectres $\overline{\Psi}(\lambda)$ sont
30 calculés à l'aide du modèle de couche utilisé,

résultant du choix des nœuds, de la loi d'interpolation et de l'épaisseur de la couche.

Le modèle physique utilisé pour le calcul de $\bar{\Psi}$ est bien sûr fonction de la méthode de mesure
5 utilisée, c'est-à-dire notamment de l'angle d'incidence de la lumière, du spectre utilisé et du modèle de couches minces ou de couches épaisses le cas échéant (voir par exemple les modèles de couches empilées dans le document [3]).

10 Les spectres Ψ étant constitués par un ensemble de mesures de natures diverses (par exemple des mesures ellipsométriques et réflectométriques), on utilise pour les mesures de réflectométrie (respectivement d'ellipsométrie) une méthode de calcul
15 de réflectométrie (respectivement d'ellipsométrie).

Les mesures réflectométriques et ellipsométriques sont combinées par l'intermédiaire d'une fonction d'erreur $Er(\Psi, \bar{\Psi})$ qui est par exemple du genre de celle qui est définie par l'équation (1).

20 Grâce à une fonction de recherche, on minimise l'écart entre $\bar{\Psi}(\lambda)$ et $\Psi(\lambda)$, en faisant varier la valeur de l'indice de réfraction et la valeur du coefficient d'extinction à la position de chacun des nœuds ainsi que l'épaisseur de couche (si cette
25 épaisseur est un facteur important dans le calcul de $\bar{\Psi}$). Lorsque l'écart est minimum c'est-à-dire lorsque $Er(\Psi, \bar{\Psi})$ est minimum, cela signifie que les mesures réflectométriques et ellipsométriques coïncident au mieux (pour un nombre de nœuds donné).

A ce stade, on obtient, pour un nombre connu de nœuds et une position spectrale connue pour chacun de ces des nœuds, le modèle de couche (indice de réfraction, coefficient d'extinction et épaisseur) qui
5 correspond au mieux à la couche réelle.

La validité du modèle trouvé est d'autant plus assurée que le nombre de mesures est grand. Pour avoir un grand nombre de mesures, on peut par exemple
10 utiliser plusieurs angles d'incidence de la lumière θ_i , $1 \leq i \leq \ell$, pour les spectres ellipsométriques, faire une mesure réflectométrique et faire des mesures goniométriques complémentaires.

Phase 3

Ensuite, on augmente le nombre de nœuds.

15 On ajoute un nombre fini de nœuds. Dans un premier mode de réalisation, les nœuds rajoutés sont positionnés de façon à représenter au mieux les spectres $n(\lambda)$ et $k(\lambda)$. A titre d'exemple, on place ces nœuds supplémentaires aux endroits où l'écart entre Ψ
20 et $\bar{\Psi}$ est maximum ou aux endroits en lesquels les nœuds sont les plus espacés. Et l'on retourne à la phase 2 tant que la précision sur chacun des spectres $n(\lambda)$ et $k(\lambda)$ et sur l'épaisseur e n'est pas suffisante, c'est-à-dire n'est pas égale à une précision
25 prédéfinie.

Dans un deuxième mode de réalisation, on intercalles de nouveaux nœuds entre deux nœuds de l'ensemble de nœuds préalablement choisis, ces nouveaux noeuds se répartissant de façon homogène sur le
30 spectre.

Il convient toutefois de noter ce qui suit.

Lorsque l'on augmente le nombre de nœuds, il n'est pas nécessaire de conserver la position des anciens nœuds. Par exemple, admettons que l'on échantillonne uniformément un spectre de 400nm à 800nm avec 3 nœuds. Ces nœuds se situent donc respectivement à 400nm, 600nm et 800nm. Lorsque l'on passe à 6 nœuds, les trois nœuds additionnels ne peuvent être placés de façon à ce que le spectre soit uniformément échantillonné si l'on conserve la position des anciens nœuds. La position des 6 nœuds peut être définie, si l'on souhaite un échantillonnage uniforme par les valeurs 400, 480, 560, 640, 720, 800nm. L'ancien nœud central à 600nm disparaît donc. Pour calculer la valeur de l'indice à ces positions à partir des anciens nœuds, on procède par interpolation.

Dans ce qui suit, nous donnons deux exemples courants d'application de l'invention. Ces exemples mettent en jeu deux types de matériaux qui suivent des lois différentes.

A partir de mesures ellipsométriques et réflectométriques, nous proposons de retrouver les lois physiques suivies par ces matériaux.

Nous procédons de la façon suivante :

Un matériau fictif est créé, ce matériau suivant une loi théorique connue (une loi de Cauchy ou une loi d'oscillateurs harmoniques), avec des paramètres que nous fixons arbitrairement. Les variations de l'indice de réfraction complexe en fonction de la longueur d'onde sont ainsi parfaitement connues.

Nous imposons en outre au matériau une épaisseur de 200,00nm, sur un substrat de silicium, ce dernier étant également très bien connu.

Des mesures fictives (mesures
5 ellipsométriques, mesures réflectométriques) sont calculées, puis bruitées de façon à introduire un défaut d'appareillage.

Tout se passe comme si nous avions des mesures réelles, effectuées sur le matériau. Mais,
10 contrairement à la réalité, nous connaissons parfaitement l'indice de réfraction complexe puisque nous l'avons fixé, de même que nous avons fixé l'épaisseur de la couche de matériau.

Nous testons ici la méthode "en aveugle",
15 c'est-à-dire que nous partons d'une épaisseur fausse (220nm) et d'indices de réfraction complexes faux, puisqu'ils sont sensés être inconnus.

Nous appliquons le procédé objet de l'invention puis nous comparons l'indice de réfraction
20 complexe trouvé à l'indice de réfraction complexe théorique. Nous retrouvons bien les mêmes lois, très précisément, ainsi que la même épaisseur de couche.

Comme premier exemple, prenons un matériau dont l'indice de réfraction complexe suit une loi de
25 Cauchy telle que :

$$n(\lambda) = 1,5 + 0,1 \frac{300^2}{\lambda^2} + 0,1 \frac{300^4}{\lambda^4}$$

$$k(\lambda) = 0$$

Cette loi d'indice est typique des résines photosensibles (dans la plage spectrale allant de 300nm
30 à 800nm).

Afin de retrouver à l'aide de la méthode des nœuds (c'est-à-dire du procédé objet de l'invention) la loi d'indice mentionnée ci-dessus, nous effectuons deux mesures, à savoir une mesure
5 ellipsométrique à un angle de 70° et une mesure réflectométrique.

Les conditions de traitement sont les suivantes :

- le spectre traité est compris entre 300nm
10 et 800nm,

- au départ, les nœuds sont aux positions (300nm, 1,6) et (800nm, 1,6), c'est-à-dire que l'indice est considéré comme variant linéairement entre 300nm et 800nm, et que sa valeur est constante (égale à 1,6),

15 - le nombre de nœuds est augmenté itérativement selon la séquence $2 \rightarrow 4 \rightarrow 6$,

- lors de la procédure d'augmentation des nœuds, la position en longueur d'onde de chaque nœud est calculée de façon que l'échantillonnage en $1/\lambda$ soit
20 uniforme (λ : longueur d'onde), la densité de points étant donc d'augmentée vers les faibles longueurs d'ondes,

- la loi d'interpolation est une loi cubique, lorsque le nombre de nœuds est supérieur à 2,
25 sinon elle est linéaire, et

- l'algorithme de minimisation utilisé est un algorithme de type Simplex.

La figure 2 permet de comparer l'indice de réfraction correspondant au matériau fictif qui suit
30 parfaitement une loi de Cauchy (courbe I) à l'indice de réfraction que nous trouvons par la méthode des nœuds

(courbe II), à l'aide de 6 nœuds (représentés par des cercles sur la figure 2). Nous avons utilisé un Ψ composé d'une mesure ellipsométrique $\{S_1(\lambda), S_2(\lambda)\}$ à 70° et d'une mesure réflectométrique $R(\lambda)$.

5 Nous aboutissons à une épaisseur de 199,8384nm.

Comme deuxième exemple, prenons un matériau dont l'indice de réfraction complexe suit une loi à deux oscillateurs harmoniques, telle que :

$$10 \quad [n(E) + jk(E)]^2 = 1 + \sum_{i=1}^2 \frac{A_i}{E + E_i + jG_i} - \frac{A_i}{E - E_i + jG_i}$$

avec

$$j^2 = -1 \text{ et } E = 1240/\lambda \text{ (}\lambda \text{ en nm)}$$

$$A_1 = 0,25 \times 1,5^2 \quad A_2 = 0,25 \times 1,5^2$$

$$E_1 = 1240/400 \quad E_2 = 1240/300$$

$$15 \quad G_1 = 0,3 \quad G_2 = 0,3$$

Dans ce deuxième exemple, la méthode des nœuds est appliquée à un ensemble de mesures ellipsométriques effectuées entre 250nm et 800nm, à 75° , 70° , 60° et 45° , avec en plus une mesure
20 réflectométrique. L'épaisseur réelle du matériau étant de 200nm, on trouve une épaisseur de 200,25 nm avec la méthode des nœuds. L'ajustement sur la loi d'indice considérée dans ce deuxième exemple est très bon, comme le montrent les figures 3A et 3B.

25 Ces figures 3A et 3B illustrent respectivement les reconstructions des courbes $n(\lambda)$ et $k(\lambda)$ du matériau à l'aide de la méthode des nœuds. La reconstruction est effectuée à l'aide de quatre spectres ellipsométriques et d'un spectre
30 réflectométrique. Les pics d'absorption réels sont très

bien représentés par la courbe obtenue par interpolation cubique entre les nœuds (représentés par des cercles sur les figures 3A et 3B).

Sur la figure 3A, la courbe I
 5 (respectivement II) correspond à un indice de réfraction n qui suit parfaitement la loi choisie (respectivement à un indice de réfraction n trouvé par la méthode des nœuds).

Sur la figure 3B, la courbe I
 10 (respectivement II) correspond à un coefficient d'extinction k qui suit parfaitement la loi choisie (respectivement à un coefficient d'extinction k trouvé par la méthode des nœuds).

On vient de décrire des exemples de
 15 l'invention. On remarquera d'une manière plus générale que, dans cette dernière, on considère un ensemble X de valeurs, avec $X = \{n_1, n_2, \dots, n_m, k_1, k_2, \dots, k_m, \varepsilon\}$, où

n_i est la valeur de l'indice de réfraction (réel) au nœud correspondant à λ_i , $i \in \{1 \dots m\}$, m étant le
 20 nombre de nœuds

k_i est la valeur du coefficient d'absorption au nœud correspondant à λ_i , $i \in \{1 \dots m\}$,

ε est l'épaisseur de la couche étudiée.

Dans ce cas, l'opération de minimisation
 25 d'erreur $E_r(\Psi, \overline{\Psi})$ revient à trouver l'ensemble ou « vecteur » X tel que E_r soit minimum.

Lorsque l'on n'impose pas de contrainte particulière, la minimisation est une minimisation à $2m+1$ paramètres. On peut bien sûr ajouter des
 30 contraintes afin de diminuer le nombre de variables.

En particulier, si l'on sait que le matériau est non absorbant, on impose $k_i=0$ pour tout i de $\{1...m\}$ et X devient : $X=\{n_1, n_2, ..., n_i, ..., n_m, e\}$.

Si, par une mesure complémentaire (par exemple une mesure de goniométrie ou une mesure directe non optique), on connaît l'épaisseur de la couche considérée avec une précision suffisante, l'épaisseur e n'est plus une variable et l'on a : $X=\{n_1, n_2, ..., n_i, ..., n_m, k_1, k_2, ..., k_1, ..., k_m\}$.

Bien entendu, les deux options précédentes peuvent être combinées.

On explique dans ce qui suit un mode de mise en œuvre de l'invention sous une forme plus générale que les exemples donnés précédemment.

Soit $\alpha(\lambda)$ une fonction de la longueur d'onde λ de la lumière utilisée pour les mesures. On peut par exemple choisir :

$\alpha(\lambda)=\lambda$ (voir les figures 3A et 3B où le spectre est uniformément échantillonné en λ)

$\alpha(\lambda)=1/\lambda$ (voir la figure 2 où le spectre est uniformément échantillonné en $1/\lambda$)

$\alpha(\lambda)=hc/\lambda$ où h est la constante de Planck et c la vitesse de la lumière dans le vide, $\alpha(\lambda)$ étant alors homogène à une énergie.

Soit A l'intervalle du spectre de mesure, B l'intervalle spectral décrit par les « nœuds » et C l'intervalle d'intérêt.

L'intervalle C est inclus dans l'intervalle B ou égal à cet intervalle B. De même, l'intervalle B

est inclus dans l'intervalle A ou égal à cet intervalle A.

On précise que chacun des intervalles A, B et C est du type $[\alpha_m, \alpha_M]$ où α_m est inférieur à α_M et il existe deux longueurs d'ondes λ_k et λ_l telles que $\alpha_m = \alpha(\lambda_k)$ et $\alpha_M = \alpha(\lambda_l)$. A titre purement indicatif et nullement limitatif, la figure 4 montre un exemple des intervalles A, B et C et des courbes des variations de Ψ et de $\bar{\Psi}$ en fonction de $\alpha(\lambda)$, $\bar{\Psi}$ étant en fait une fonction de $n^*(\alpha(\lambda))$.

Les cercles N représentent les nœuds.

n^* est l'indice complexe, qui est exprimé ici en fonction de $\alpha(\lambda)$ et dont les parties réelle et imaginaire sont respectivement notées $n(\alpha(\lambda))$ et $k(\alpha(\lambda))$.

On voit également, à titre purement indicatif et nullement limitatif, un exemple de la courbe des variations de n (respectivement k) en fonction de $\alpha(\lambda)$, passant par des points de coordonnées (n_1, α_1) (respectivement (k_1, α_1)), où $\alpha_1 = \alpha(\lambda_1)$, $n_1 = n(\alpha_1)$, $k_1 = k(\alpha_1)$, $1 \leq i \leq m$ (m entier naturel non nul).

Sur la figure 4, on notera la correspondance entre les nœuds N, les points (n_1, α_1) et les points (k_1, α_1) .

Dans le mode de mise en œuvre considéré, on utilise un algorithme comprenant les étapes suivantes :

1. on fait les mesures Ψ sur l'intervalle A et l'on choisit les méthodes de calcul associées aux mesures (calculs ellipsométriques ou réflectométriques) ;

2. on choisit m nombres α_i (constituant m valeurs initiales de la fonction α), i appartenant à $\{1, \dots, m\}$, avec $m \geq 1$, et $\{\alpha_i\} \subset A$ (les α_i correspondant aux « nœuds ») ; lorsque $m > 1$, B est défini comme l'ensemble
5 des points α tels que $\min(\alpha_i) \leq \alpha \leq \max(\alpha_i)$; lorsque $m=1$, on a $B=A$;

3. on choisit m valeurs initiales d'indice complexe n^* aux m points α_i , i appartenant à $\{1, \dots, m\}$;

4. si $m \neq 1$ on choisit une loi
10 d'interpolation qui permet de calculer l'indice de réfraction $n(\alpha)$ sur l'intervalle B à partir des points (α_i, n_i) , i appartenant à $\{1, \dots, m\}$; si $m=1$, alors $n(\alpha) = n_1(\alpha_1)$ sur tout l'intervalle B ;

5. on choisit M paramètres variables avec
15 $M \leq 2m+1$; ces paramètres peuvent être par exemple :

- les parties réelles des indices de réfraction aux points α_i , i appartenant à $\{1, \dots, m\}$, ou
- les parties imaginaires des indices de réfraction en ces mêmes points, ou
- 20 - l'épaisseur du matériau dont on cherche l'indice de réfraction ;

6. on choisit une fonction d'erreur $Er(\Psi, \bar{\Psi})$ qui caractérise l'écart entre un spectre mesuré et un spectre théorique ; en général, l'erreur
25 est mesurée sur l'intervalle C ;

7. à l'aide d'une fonction de minimisation de $Er(\Psi, \bar{\Psi})$ à M paramètres, on effectue la série d'étapes suivantes :

a) à l'aide de la fonction d'interpolation des (α_i, n_i) sur B, on déduit $n(\alpha)$ avec α appartenant à B ;

5 b) à l'aide de $n(\alpha)$ de l'épaisseur ε et des méthodes de calcul de spectre, on calcule le spectre théorique $\bar{\Psi}(n(\alpha), \varepsilon)$;

c) on compare Ψ et $\bar{\Psi}$ à l'aide de $Er = Er(\Psi, \bar{\Psi})$; si Er est suffisamment petite (c'est-à-dire si Er est inférieure à une valeur prédéfinie \underline{e}),
10 ou bien si Er est minimale, on passe à l'étape e), sinon on passe à l'étape d) ;

d) on fait varier les M paramètres de façon à tendre vers le minimum de Er et l'on revient à l'étape a) ;

15 e) si Er est inférieure à \underline{e} on obtient donc un ensemble de M paramètres tel que $Er(\Psi, \bar{\Psi}(n(\alpha, M), \varepsilon))$ est minimum et le calcul de l'indice de réfraction est achevé : cet indice est pris égal à celui qui a été obtenu en dernier ; et si Er est supérieure ou égale à
20 \underline{e} , on passe à l'étape 8) ;

8. on augmente m et l'on revient à l'étape 2).

Il convient de noter que la présente invention peut utiliser non seulement des
25 échantillonnages en longueur d'onde (λ) mais encore des échantillonnages en fréquence (c/λ ou, plus simplement $1/\lambda$), en énergie (hc/λ) et, plus généralement, en paramètre fonction de la longueur d'onde.

Il convient en outre de noter qu'une étape
30 essentielle de l'algorithme (étape 8) mentionnée plus

haut) n'est pas limitée à l'ajout d'un ensemble de nœuds aux nœuds déjà existants : elle englobe le cas plus général où le nombre de nœuds augmente. Cela veut dire, dans un mode de réalisation particulier de l'invention, qu'après minimisation avec 3 nœuds, si l'on veut passer à 6 nœuds au total, la position des 3 anciens nœuds est « effacée » de façon, par exemple, à avoir une densité de nœuds constante sur le spectre. En pratique, c'est la meilleure option. L'information sur l'ancienne position des anciens nœuds n'est pas perdue car la valeur des indices aux anciens nœuds est utilisée pour calculer la valeurs des 6 nouveaux nœuds (en fait 3 nouveaux nœuds plus trois anciens nœuds).

Ainsi, selon un mode de mise en œuvre particulier du procédé objet de l'invention, on peut augmenter le nombre de valeurs initiales de la fonction α en ajoutant une ou plusieurs valeurs aux valeurs initiales existantes ; mais, selon un mode de mise en œuvre préféré, on peut augmenter le nombre de valeurs initiales de la fonction α en remplaçant les valeurs initiales existantes par de nouvelles valeurs initiales dont le nombre est supérieur au nombre des valeurs initiales existantes.

La présente invention n'est pas limitée à la caractérisation de couches minces. Elle s'applique aussi à la caractérisation de couches épaisses.

En outre, la présente invention n'est pas limitée à la caractérisation d'une seule couche, formée sur un substrat. Elle s'applique aussi à la caractérisation de deux, ou plus de deux, couches formées sur un substrat.

Les documents cités dans la présente description sont les suivants :

[1] R.M.A. Azzam and N.M. Bashara, Ellipsometry and Polarized Light, North-Holland Physics
5 Publishing, 1997, chapitre 6.

[2] B. K. Minhas, S.A. Coulombe, S. Sohail, H. Naqvi and J.R. McNeil, Ellipsometric scatterometry for the metrology of sub-0.1- μm -linewidth structures, Applied Optics, 37(22) : 5112-5115, 1998.

10 [3] M. Born and E. Wolf, Principle of Optics, Cambridge University Press edition.

[4] A.R. Forouhi and I. Bloomer, Optical dispersion relations for amorphous semiconductors and amorphous dielectrics, Physical Review B, 34(10) :
15 7018-7026, November 1986.

[5] F. L. Terry, Jr., A modified harmonic oscillator approximation scheme for the dielectric constants of $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$, Journal of Applied Physics, 70(1), 1991, pages 409-417.

20 [6] W. H. Press, S. A. Teukolsky, W. T. Vetterling and B. P. Flannery, Numerical Recipes in C, Cambridge University Press, 1992, chapitres 3 et 10.

REVENDICATIONS

1. Procédé de caractérisation optique d'au moins une couche d'un matériau dans un intervalle A de valeurs prises par une fonction α d'une longueur d'onde
- 5 optique λ , lorsque λ varie dans un intervalle de longueurs d'ondes, cette couche étant formée sur un substrat, ce procédé étant caractérisé en ce qu'il comprend les étapes suivantes :
- 1) on effectue un ensemble de mesures de réflectométrie
- 10 et/ou d'ellipsométrie sur l'intervalle A, cet ensemble de mesures conduisant à un spectre mesuré, noté Ψ , et l'on choisit les méthodes de calcul associées à la nature des mesures et au type de couche à caractériser,
- 2) on choisit m valeurs initiales $\alpha_1 \dots \alpha_m$ de la fonction
- 15 α , appartenant à cet intervalle A, m étant un nombre entier au moins égal à 1, et l'on définit un intervalle B comme étant l'ensemble des points α de l'intervalle allant du plus petit au plus grand des nombres $\alpha_1 \dots \alpha_m$, lorsque m est supérieur à 1, et comme
- 20 étant l'intervalle A lorsque m vaut 1,
- 3) on choisit m valeurs initiales complexes d'un indice de réfraction complexe $n^* = n + jk$ aux m points α_i , i allant de 1 à m,
- 4) lorsque m est différent de 1, on choisit une loi
- 25 d'interpolation qui permet de calculer l'indice de réfraction $n(\alpha)$ du matériau sur l'intervalle B, à partir des points (α_i, n_i) , avec $n_i = n(\alpha_i)$, i allant de 1 à m, et lorsque m vaut 1, $n(\alpha)$ est pris égal au nombre $n_1(\alpha_1)$ sur tout l'intervalle B,

- 5) on choisit M paramètres variables, M étant inférieur ou égal à $2m+1$,
- 6) on choisit une fonction d'erreur $Er(\Psi, \bar{\Psi})$ qui caractérise l'écart entre un spectre mesuré Ψ et un spectre théorique $\bar{\Psi}$,
- 7) à l'aide d'une fonction de minimisation de $Er(\Psi, \bar{\Psi})$ à M paramètres, on effectue la série d'étapes suivante :
- a) à l'aide de la loi d'interpolation des (α_i, n_i) sur l'intervalle B , on déduit $n(\alpha)$, α appartenant à B ,
- b) à l'aide de $n(\alpha)$ et de l'épaisseur ε de la couche, et de méthodes de calcul de spectres, on calcule un spectre théorique $\bar{\Psi}(n(\alpha), \varepsilon)$,
- c) on compare Ψ et $\bar{\Psi}$ à l'aide de $Er(\Psi, \bar{\Psi})$ et, si $Er(\Psi, \bar{\Psi})$ est suffisamment petite, c'est-à-dire inférieure à une valeur prédéfinie \underline{e} , ou est minimale, on passe à l'étape e), sinon on passe à l'étape d),
- d) on fait varier les M paramètres variables de façon à tendre vers le minimum de $Er(\Psi, \bar{\Psi})$ et l'on retourne à l'étape a),
- e) si $Er(\Psi, \bar{\Psi})$ est inférieure à \underline{e} , on obtient donc un ensemble de M paramètres variables, pour lequel $Er(\Psi, \bar{\Psi}(n(\alpha, M), \varepsilon))$ est minimum et l'indice de réfraction est alors pris égal à celui qui a été obtenu en dernier, et si $Er(\Psi, \bar{\Psi})$ est supérieure ou égale à \underline{e} on passe à l'étape 8),
- 8) on augmente le nombre m de valeurs initiales de la fonction α et l'on retourne à l'étape 2).

2. Procédé selon la revendication 1, dans lequel on augmente le nombre de valeurs initiales de la fonction α en ajoutant une ou plusieurs valeurs aux valeurs initiales existantes.

5 3. Procédé selon la revendication 1, dans lequel on augmente le nombre de valeurs initiales de la fonction α en remplaçant les valeurs initiales existantes par de nouvelles valeurs initiales dont le nombre est supérieur au nombre des valeurs initiales
10 existantes.

4. Procédé selon l'une quelconque des revendications 1 à 3, dans lequel chaque loi d'interpolation est choisie parmi les lois d'interpolation linéaires, les lois d'interpolation
15 cubiques, les lois d'interpolation polynômiales et les lois d'interpolation par exemple de type fonction spline.

5. Procédé selon l'une quelconque des revendications 1 à 4, dans lequel les valeurs
20 initiales de la fonction α sont réparties de manière uniforme dans l'intervalle A, la répartition des nœuds étant ainsi homogène.

6. Procédé selon l'une quelconque des revendications 1 à 5, dans lequel $\alpha(\lambda)$ est choisi parmi
25 λ , $1/\lambda$ et hc/λ , où h est la constante de Planck et c est la vitesse de la lumière dans le vide.

7. Procédé selon l'une quelconque des revendications 1 à 6, dans lequel on mesure l'erreur, à l'étape 6), sur un intervalle d'intérêt C qui est
30 inclus dans l'intervalle B ou égal à cet intervalle B.

8. Procédé selon l'une quelconque des revendications 1 à 7, dans lequel les M paramètres variables sont les parties réelles des indices de réfraction aux points α_i , i allant de 1 à m.

5 9. Procédé selon l'une quelconque des revendications 1 à 7, dans lequel les M paramètres variables sont les parties imaginaires des indices de réfraction aux points α_i , i allant de 1 à m.

10 10. Procédé selon l'une quelconque des revendications 1 à 7, dans lequel les M paramètres variables sont constitués par l'épaisseur du matériau dont on cherche l'indice de réfraction.

11. Procédé de caractérisation optique d'au moins une couche d'un matériau dans un intervalle de longueurs d'ondes $[\lambda_{\min}, \lambda_{\max}]$, cette couche étant formée sur un substrat, ce procédé étant caractérisé en ce que :

- on effectue un ensemble de mesures de réflectométrie et/ou d'ellipsométrie, cet ensemble de mesures conduisant à un spectre mesuré, noté Ψ ,

20 - on choisit m longueurs d'ondes initiales $\lambda_1 \dots \lambda_m$ appartenant à cet intervalle, m étant un nombre entier au moins égal à 1, on associe, à chaque longueur d'onde, un indice de réfraction,

25 - on choisit une loi d'interpolation au moins pour l'indice de réfraction du matériau, pour les longueurs d'ondes comprises entre les longueurs d'ondes initiales $\lambda_1 \dots \lambda_m$,

30 - on choisit M paramètres initiaux, M étant au moins égal à m, à savoir un indice de réfraction initial n_1

pour chaque longueur d'onde initiale λ_i , $1 \leq i \leq m$,
les longueurs d'ondes initiales étant choisies de
manière à pouvoir déterminer par interpolation au
moins l'indice de réfraction pour toute longueur
5 d'onde de l'intervalle $[\lambda_{\min}, \lambda_{\max}]$, les couples
 (λ_i, n_i) étant appelés nœuds,
- on choisit des méthodes de calcul de réflectométrie
et d'ellipsométrie,
- on choisit aussi une fonction d'erreur E_r ,
10 représentative de l'écart entre deux spectres Ψ_1 et
 Ψ_2 , les spectres Ψ_1 et Ψ_2 étant calculés ou mesurés
sur un nombre de points supérieur au nombre m de
nœuds,
- à l'aide des m longueurs d'ondes initiales, des M
15 paramètres initiaux et de la loi d'interpolation, on
met en œuvre le processus d'optimisation suivant :
- on détermine un spectre théorique, noté
 $\bar{\Psi}$, en fonction des méthodes de calcul choisies, et de
l'indice déduit par interpolation de sa valeur en λ_i , i
20 allant de 1 à m , sur le spectre $[\lambda_{\min}, \lambda_{\max}]$,
- on détermine l'erreur $E_r(\Psi, \bar{\Psi})$, entre le spectre
mesuré et le spectre théorique
- on minimise cette erreur en faisant varier la
position des valeurs des indices inconnus et/ou
25 l'épaisseur de la couche et/ou les valeurs des indices
de réfraction aux longueurs d'ondes initiales, et l'on
obtient un spectre,

- on ajoute des longueurs d'ondes aux longueurs d'ondes initiales $\lambda_1 \dots \lambda_m$, les longueurs d'ondes ajoutées constituant de nouveaux nœuds,
 - on répète le procédé en choisissant un nombre m' de longueurs d'ondes initiales, m' étant supérieur à m , et M' paramètres initiaux, M' étant supérieur à M , jusqu'à ce que la précision sur chaque spectre ainsi représenté au mieux soit égale à une précision prédéfinie.
12. Procédé selon la revendication 11, dans lequel m est au moins égal à 2.
13. Procédé selon la revendication 11, dans lequel m est égal à 1 et l'on choisit des indices de réfraction initiaux égaux.
14. Procédé selon l'une quelconque des revendications 11 à 13, dans lequel le matériau est non absorbant et le nombre M est égal à m , le coefficient d'extinction du matériau étant pris égal à 0.
15. Procédé selon l'une quelconque des revendications 11 à 13, dans lequel :
- M est au moins égal à 2 m ,
 - on choisit en outre une loi d'interpolation pour le coefficient d'extinction du matériau,
 - pour chaque longueur d'onde initiale λ_i , $1 \leq i \leq m$,
- on choisit en outre un coefficient d'extinction initial k_i , les longueurs d'ondes initiales étant en outre choisies de manière à pouvoir déterminer par interpolation le coefficient d'extinction pour toute longueur d'onde de l'intervalle $[\lambda_{\min}, \lambda_{\max}]$,

- dans le processus d'optimisation, on minimise l'erreur en faisant varier en outre les valeurs des coefficients d'extinction aux longueurs d'ondes initiales et les longueurs d'ondes ajoutées sont en
5 outre placées de façon à représenter au mieux le spectre du coefficient d'extinction du matériau.

16. Procédé selon la revendication 15, dans lequel m est égal à 1 et l'on choisit des indices de réfraction initiaux égaux et des coefficients
10 d'extinction initiaux égaux.

17. Procédé selon l'une quelconque des revendications 11 à 16, dans lequel la couche de matériau est mince, c'est-à-dire a une épaisseur inférieure à la longueur de cohérence de la lumière
15 utilisée pour les mesures, on choisit un paramètre initial supplémentaire, à savoir une épaisseur initiale de couche, et dans le processus d'optimisation on minimise l'erreur en faisant en outre varier la valeur de l'épaisseur de couche.

20 18. Procédé selon l'une quelconque des revendications 11 à 16, dans lequel la couche de matériau est épaisse, c'est-à-dire n'est pas mince, et M est au plus égal à 2 m .

25 19. Procédé selon l'une quelconque des revendications 11 à 16, dans lequel l'épaisseur de la couche de matériau est connue avec une précision prédéfinie et M est au plus égal à 2 m .

30 20. Procédé selon l'une quelconque des revendications 11 à 19, dans lequel chaque loi d'interpolation est choisie parmi les lois d'interpolation linéaires, les lois d'interpolation

cubiques, les lois d'interpolation polynômiales et les lois d'interpolation de type fonction spline.

21. Procédé selon l'une quelconque des revendications 11 à 20 , dans lequel la répartition des
5 nœuds est homogène.

1 / 3

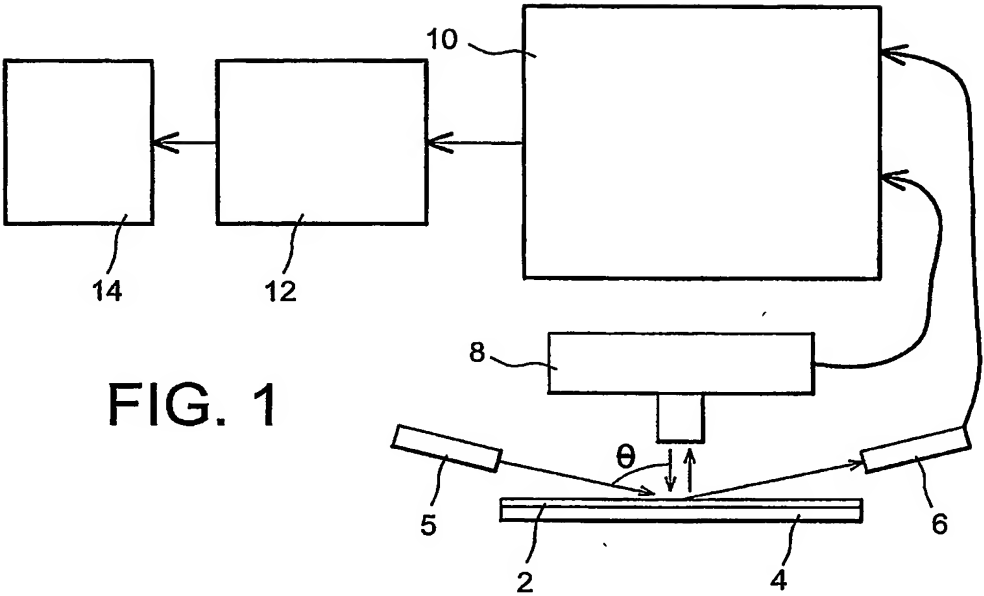


FIG. 1

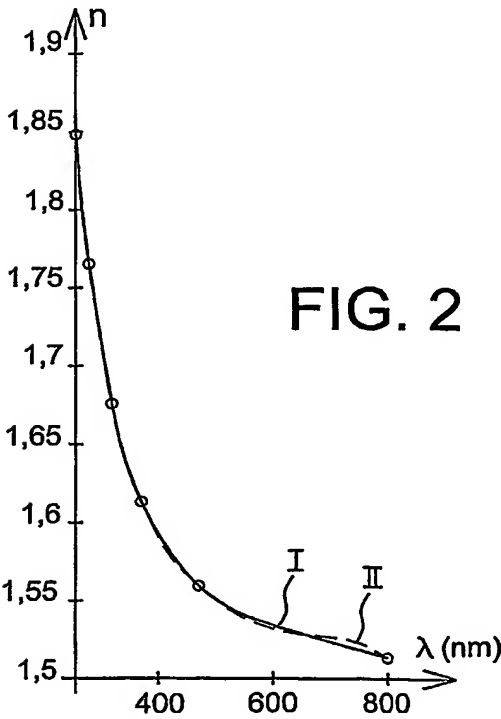


FIG. 2

2 / 3

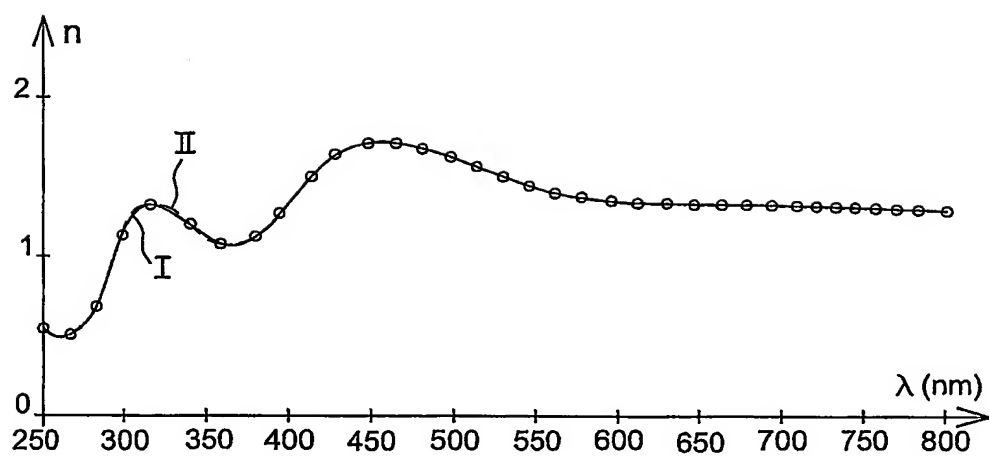


FIG. 3A

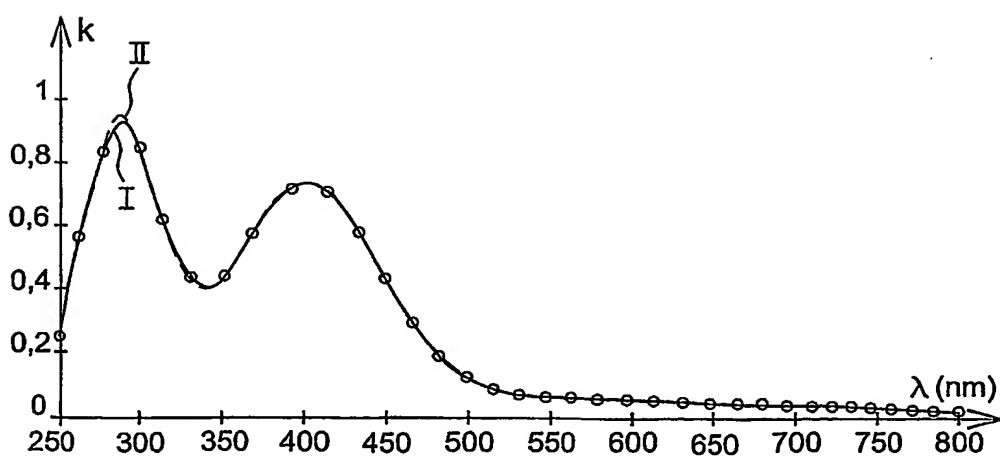


FIG. 3B

3 / 3

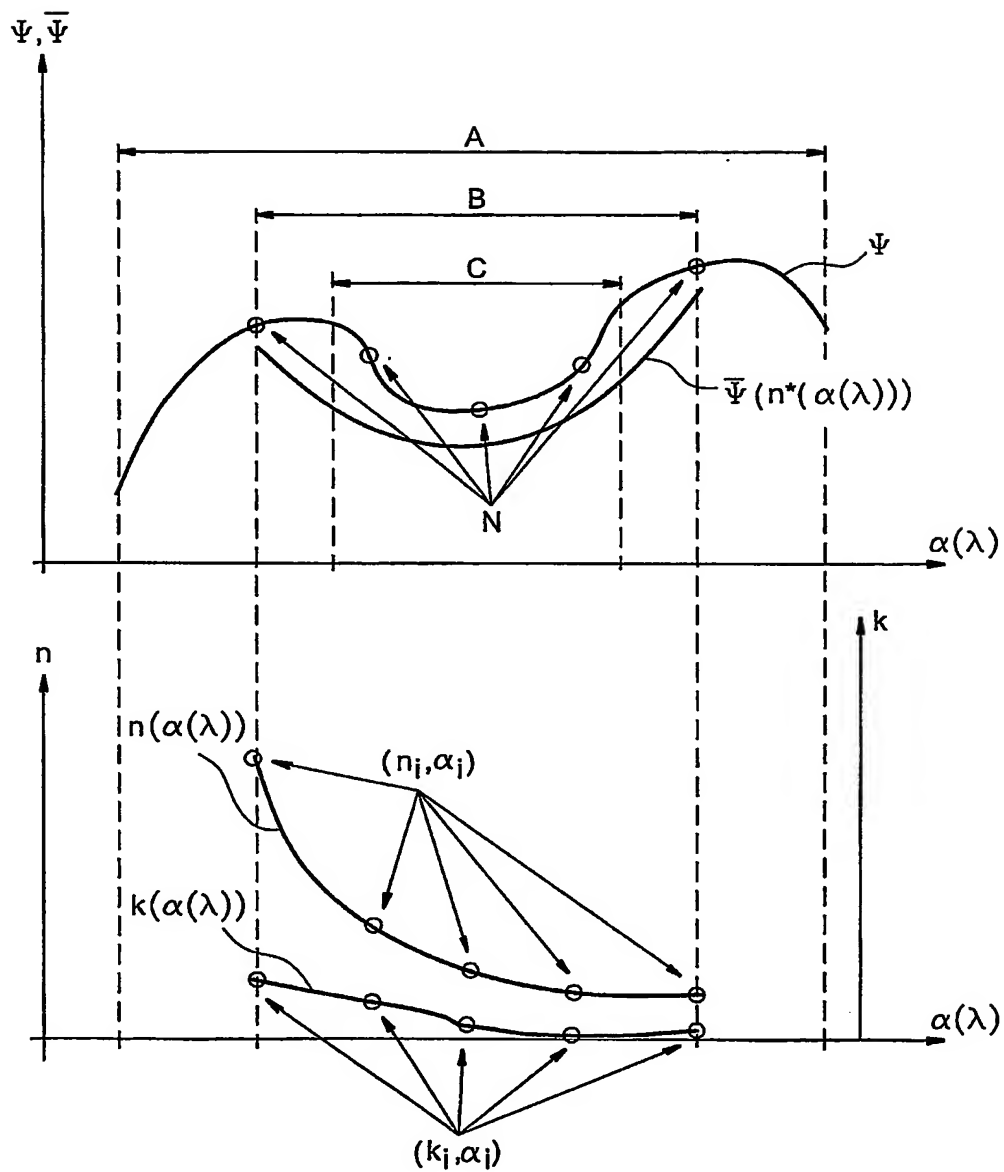


FIG. 4